

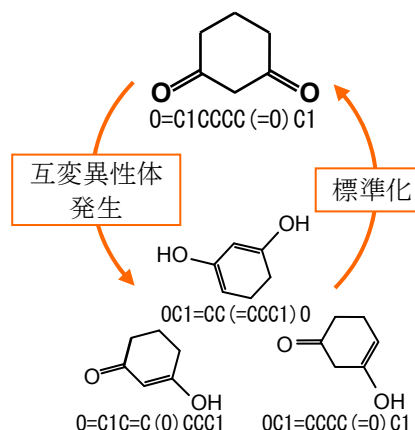
ケムインフォマティクスシステム構築ツール

Daylight

Toolkits / Database Server Systems

Daylight ソフトウェアの特長

- 分子構造をコンパクトに表現して処理する SMILES 機能
- Daylight フィンガープリントにより、類似構造をすばやく効果的に絞り込み
- 化学情報を効率的に扱えるように設計された THOR データベース
- Merlin システムによる極めて高速なデータベース検索
- 互変異性体の網羅的発生と標準化に対応する高度な化学構造認識
- ツールキットやパッケージの組み合わせによる柔軟なカスタマイズ



概要

Daylight 社のソフトウェア群は、*in-silico* 創薬および化学情報管理システムを構築するための開発用ツールです。化合物・化学反応情報のデータベース登録・検索や、化合物に対する様々な操作を効率よく行えるよう設計されています。システムの規模に係わらず、プロジェクトや創薬戦略に応じた理想的な化学情報管理システムが構築できます。

ソフトウェア群は大きく分けると、プログラミング環境を提供する“ツールキット”、独自のデータ形式で化学情報を高速に処理する“データベースパッケージ”、各種の“コマンドラインツール”、化学情報を処理する Oracle カートリッジ“DayCart”、および“データコンテンツ”があります。

ツールキット

- **SMILES Toolkit**
分子オブジェクトと SMILES 言語
- **SMARTS Toolkit**
部分構造認識と SMARTS パターン言語
- **Fingerprint Toolkit**
フィンガープリントの作成とカスタマイズ
- **Reaction Toolkit**
化学反応情報の処理
- **Depict Toolkit**
2D と 3D の描画情報
- **THOR Toolkit**
THOR system の利用
- **Merlin Toolkit**
Merlin system の利用

データベースパッケージ

- **THOR system**
化学情報データベースの登録と参照
- **Merlin system**
高速検索と探索的データ解析
- **Merlin Control Language**
Merlin 検索自動化用のスクリプト言語 (オプション)
- **Reaction Package**
反応データベース機能 (オプション)

コマンドラインツール

- **Clustering Package**
大規模セットのクラスター解析
- **PC Model, DayProp**
分子物性 (ClogP, CMR 等) の計算と互変異性体発生

Daylight ツールキット

すでにお使いのサードパーティーツールと組み合わせることで、Daylight ツールキットの機能を一連の解析の中でシームレスに利用できます。Daylight システムへのインターフェースとして使用するばかりでなく、研究の幅も広がります。

Daylight ツールキットのシステム構築例

例えば、CCG 社製 MOE や InforSense KDE と組み合わせると、下記のような使い方が可能です。



CCG 社 MOE

Merlin パネル

MOE 上の分子から SMILES 文字列を自動生成

パネルを使って検索条件を設定

検索結果は一覧表示と二次元分子構造で表示

フィンガープリント計算

他のフィンガープリントと同様に Daylight フィンガープリントも計算

Field	Description
FP:BIT Daylight	Daylight Fingerprint (Bit packed)
FP:BIT MACCS	MACCS Structural Keys (Bit packed)
FP:Daylight	Daylight Fingerprint
FP:ESshape3D	ShapeEigenSpectrum
FP:ESshape3D_H D	ShapeEigenSpectrumHYD
FP:GpiDAPH3	Graph 3-Point Pharmacophore
FP:MACCS	MACCS Structural Keys
FP:TAD	Typed Atom Distances
FP:TAT	Typed Atom Triangles
FP:TGD	Typed Graph Distances



Merlin server

高速検索



登録・参照

THOR server



InforSense KDE

Merlin ノード

類似構造検索ノードの例

検索条件や処理を設定するノードをつなげて、複雑なクエリも簡単に実現

描画ツールでクエリ分子を作成可能

ヒットした分子の二次元構造をタイル状に一覧表示

THOR ノード

データベース作成ノードの例

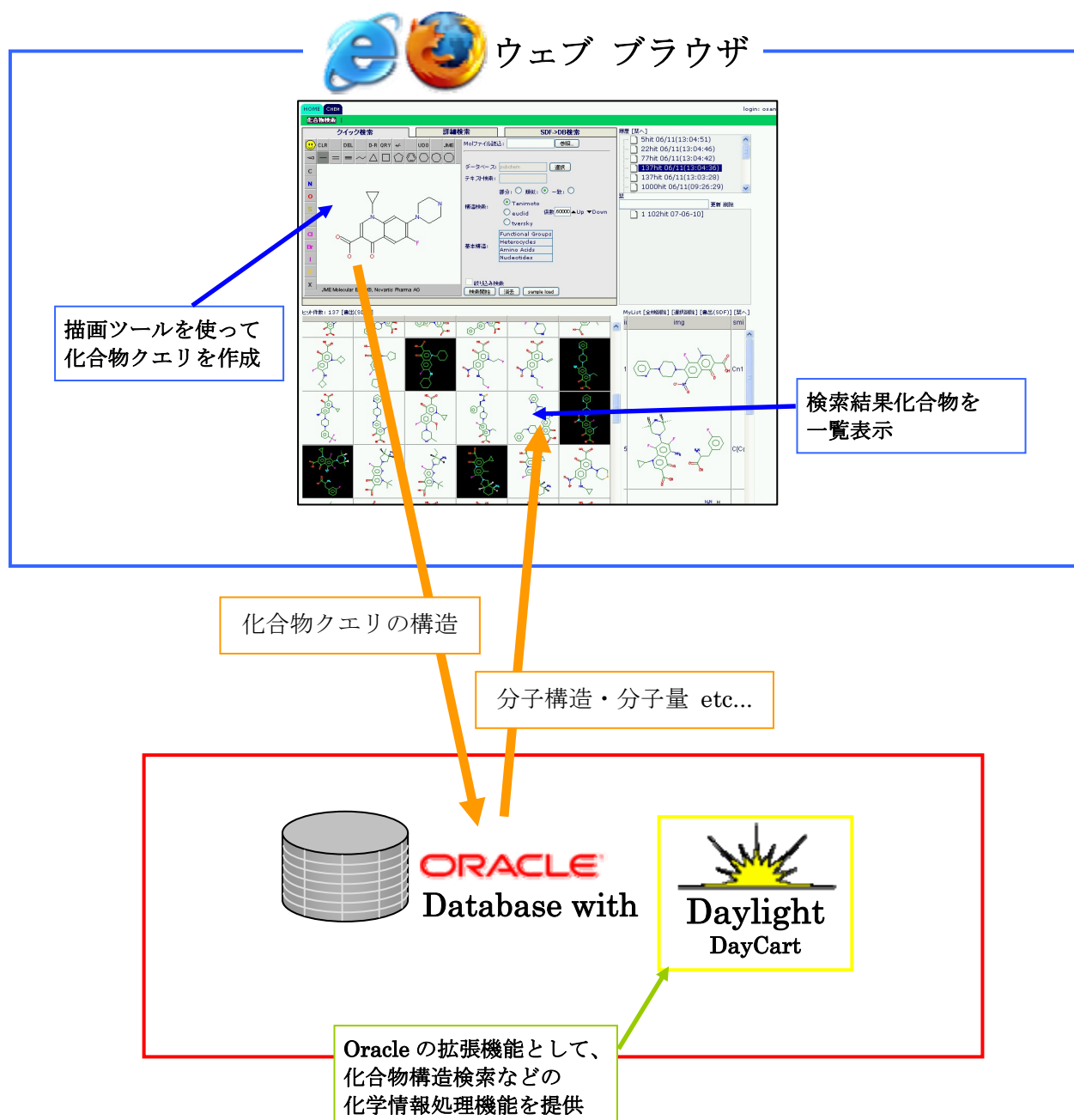
データベース作成やデータ取り込みなど、作業ステップごとにノードを配置

DayCart Oracle カートリッジ

Oracle データベースの拡張機能として Daylight の化合物処理機能を組み込むカートリッジが用意されています。Oracle の堅牢なデータベースを利用して、高速な化合物登録・検索システムを構築することができます。

DayCart のシステム構築例

例えば、Oracle データベース、Web サーバ、描画ツールと組み合わせることで、下記のような化合物登録・検索システムが構築できます。表示項目などの画面構成は、柔軟にカスタマイズすることができます。



データコンテンツ

THOR/Merlin 形式、DayCart 形式にて以下のコンテンツが提供されています。

データベース	概要	提供元
ACD (Available Chemicals Directory™)	48 万件以上の重複のない、商業的に入手可能な化合物のデータベース	MDL
MedChem	LogP や pKa が測定されたものも含め、総数 5 万 5000 件以上の化合物のデータベース	BioByte Corp.
SPRESI	56 万件以上の文献データから抽出された約 380 万件の化合物のデータベース	InforChem GmbH
WDI (World Drug Index™)	約 8 万件の医薬品・薬理活性化化合物データベース	Derwent Publications

- 詳細はお問い合わせください。
- 記載の商品名は各社の商標または登録商標です。
- 本カタログの記載内容は予告なく変更される場合があります。

(2008/08/25)

Ryoka
Systems
Inc.

Daylight C. I. S. 社代理店

株式会社 菱化システム 科学技術システム事業部 計算科学部

〒104-0033 東京都中央区新川 1-28-38 東京ダイヤビル 3 号館 3 階

Phone: 03-3553-9206(直)

FAX: 03-3553-9207(直)

URL: <http://www.rsi.co.jp/>

E-mail: support@rsi.co.jp